КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ И МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА

УДК 530.145

НОВЫЕ АСПЕКТЫ В СПЕКТРАЛЬНОЙ ЗАДАЧЕ РАДИАЛЬНОГО УРАВНЕНИЯ ШРЁДИНГЕРА С ПРОИЗВОЛЬНЫМ ПРИТЯГИВАЮЩИМ ПОТЕНЦИАЛОМ

О. С. Павлова, А. Р. Френкин

(*кафедра теоретической физики; кафедра квантовой теории и физики высоких энергий*)

В работе представлена дальнейшая разработка операторного метода интегральных преобразований для нахождения энергетического спектра радиального уравнения Шрёдингера, используемого для притягивающих потенциалов

Ранее в работах [1–4] был разработан метод интегральных преобразований для определения спектра энергий радиального уравнения Шрёдингера (УШ), в основе которого лежит исследование лапласовских образов волновых функций. При этом задача сводилась к приближенному решению характеристического уравнения бесконечной системы линейных алгебраических уравнений. В работе [1] были рассмотрены удерживающий потенциал степенного роста на бесконечности и ядерно-кулоновский. В работах [2, 3] был разработан операторный вариант метода интегральных преобразований для притягивающих потенциалов. Вывод окончательных формул [3, 4] опирался на суммирование расходящихся рядов по обратным степеням энергии. В данной статье мы предлагаем новый способ определения спектра энергий без формального рассмотрения и суммирования расходящихся рядов.

Рассмотрим УШ с произвольным орбитальным квантовым числом $l = 0, 1, 2, \dots$

$$\frac{d^2\Psi}{dr^2} - \frac{l(l+1)\Psi}{r^2} - V(r)\Psi + E\Psi = 0 \quad (\hbar = 2m = 1), \tag{1}$$

с потенциалом притяжения

$$V(r) = V(r/a) = -\frac{V_0}{r} + \widetilde{V}(r), \quad a > 0, \tag{2}$$

допускающим разложение

$$\widetilde{V}(r) = \sum_{N=0}^{\infty} b_N \left(\frac{r}{a}\right)^N$$

и убывающим на бесконечности. При $V_0 \neq 0$ потенциал (2) имеет кулоновскую особенность для $r = 0$. Для таких потенциалов при нахождении спектра в работах [3, 4] приходилось суммировать расходящиеся ряды для каждого потенциала в отдельности.

Однако нахождение энергетического спектра для ряда потенциалов можно предельно упростить, если воспользоваться решением задачи для экспоненциального потенциала [3]

$$V(r) = -\frac{\widetilde{V}_0}{a} e^{-r/a}, \tag{3}$$

для которого спектр определяется из характеристического уравнения

$$\det(\widetilde{\mathcal{B}}_{nk}(x) - (n+l+1)\delta_{nk}) = 0 \quad (n, k = 0, 1, ..), \tag{4}$$

где

$$\widetilde{\mathcal{B}}_{nk}(x) = -\widetilde{q} x^2 \frac{d\sigma_{nk}}{dx}, \quad \widetilde{q} = \widetilde{V}_0 a, \tag{5}$$

причем энергия

$$E = -\frac{1}{(2ax)^2}. \tag{6}$$

Матрица σ_{nk} получена в замкнутой форме в работе [1] с помощью решения некоторого интегрального уравнения и равна

$$\sigma_{nk} = \frac{k!}{(1+x)^{n+k+2(l+1)}\Gamma(k+2l+2)} \times$$
$$\times \sum_{m=\max\{n-k,0\}}^{n} \frac{x^{k-n+2m}(1-x^2)^{k-m}\Gamma(k+m+2l+2)}{m!(n-m)!\Gamma(k+m-n+1)}.$$

Существование простого решения задачи для потенциала (3) означает, что через σ_{nk} должна выражаться спектральная матрица $\mathcal{B}_{nk}(x)$ для любого потенциала притяжения, для которого существует преобразование Лапласа:

$$V(r) = V(\frac{r}{a}) = \int_0^{\infty} K(y) e^{-\frac{r}{a}y} dy. \tag{7}$$

Тогда спектр энергий определяется из спектрального уравнения (4), в котором матрица $\widetilde{\mathcal{B}}_{nk}(x)$ заменена на

$$\mathcal{B}_{nk}(x) = -\frac{a}{\widetilde{V}_0} \int_0^{\infty} K(y) \frac{1}{y^2} \widetilde{\mathcal{B}}_{nk}(xy) dy. \tag{8}$$

Это связано с тем, что при разложении экспоненты $e^{-z} = \sum_{N=0}^{\infty}(-z)^N/N!$, $z = ry/a$ появляются лишние множители y^N, что приводит к замене аргумента x матрицы $\sigma_{nk}(x)$ на xy, причем множитель x^2 в (5) остается неизменным.

Подстановка (5) в (8) дает спектральную матрицу $\mathcal{B}_{nk}(x)$ для любого потенциала притяжения, для которого существует преобразование (7):

$$\mathcal{B}_{nk}(x) = a^2 x \int_0^\infty K(\frac{t}{x})\frac{d\sigma_{nk}(t)}{dt}dt.$$

Заметим, что мы будем рассматривать только такие потенциалы, для которых формула (7) справедлива и при $r = 0$, т. е. мы требуем, чтобы было выполнено условие $|\int_0^\infty K(y)dy| < \infty$.

Преобразования Лапласа (7) существуют для целого ряда потенциалов $V(r) = V(r/a)$. (см. [5]), оттуда же могут быть взяты и их лапласовские образы $K(y)$.

В качестве примера определим сначала спектр УШ с потенциалами притяжения:

$$V_1(r) = -\frac{V_0}{a}\frac{1}{(1+r/a)^3}, \quad V_2(r) = -\frac{V_0}{r}\frac{1}{(1+r/a)^2}.$$

Оба потенциала одинаково убывают на бесконечности (как $-V_0 a^2/r^3$) и при достаточно большом параметре $q = V_0 a$ имеют конечное число уровней энергии. Однако второй потенциал имеет еще и кулоновскую особенность при $r = 0$.

Лапласовские образы $K(y)$ для потенциалов $V_1(r)$ и $V_2(r)$ соответственно равны

$$K_1(y) = -\frac{V_0}{2a}y^2 e^{-y}, \quad K_2(y) = -\frac{V_0}{2a} + \frac{V_0}{a}(1+y)e^{-y}.$$

В спектральном уравнении (4) матрицы $\mathcal{B}_{nk}(x)$ для выбранных потенциалов равны

$$\mathcal{B}_{nk}^{(1)}(x) = -\frac{q}{2}x^2 \int_0^\infty e^{-t}t^2 \frac{d\sigma_{nk}(xt)}{d(xt)}dt,$$

$$\mathcal{B}_{nk}^{(2)}(x) = qx\delta_{nk} + q_0 x \int_0^\infty e^{-t}(1+t)\frac{d\sigma_{nk}(xt)}{d(xt)}dt.$$

В качестве еще одного примера исследовался спектр энергий УШ с потенциалом

$$V_3(r) = -\frac{2V_0}{a\pi}\arctan\frac{a}{r}, \quad K_3(y) = -\frac{2V_0}{a\pi}\frac{\sin(y)}{y}.$$

При этом спектральная матрица в (4) равна

$$\mathcal{B}_{nk}^{(3)}(x) = -\frac{2q}{\pi}x^2 \int_0^\infty \frac{\sin t}{t}\frac{d\sigma_{nk}(xt)}{d(xt)}dt.$$

Для каждого из приведенных потенциалов при определенных значениях параметра $q = aV_0$ уравнение (4) решалось для $l = 0$ последовательно при различных рангах K матрицы $\mathcal{B}_{nk}(x)$. При $K = 1$ ($n = 0$; $k = 0$) уравнение (4) имеет одно решение x_0, которое соответствует основному состоянию (см. (6)). При $K = 2$ ($n = 0, 1$, $k = 0, 1$) при некоторых значениях параметра q появляется еще одно решение x_1, которое соответствует следующему уровню энергии. При $K = 3$ ($n = 0, 1, 2$, $k = 0, 1, 2$) возможно появление следующего корня x_2, т. е. еще одного уровня энергии.

В табл. 1–3 представлены зависимости значений величин x_0, x_1, x_2 от параметров q и ранга матрицы K для рассматриваемых потенциалов V_1, V_2, V_3.

Таблица 1

$$\boldsymbol{V_1(r) = -[q/a^2](1+r/a)^{-3}}$$

q	10	20	50	100
$K=1$	1.5100	.40800	.16817	.10023
$K=2$	1.0645	.40295	.16468	.09367 .19113
$K=3$	1.0310	.40220	.16302	.09342 .19062

Таблица 2

$$\boldsymbol{V_2(r) = -[q/ar](1+r/a)^{-2}}$$

q	5	10	20	50
$K=1$		.16423	.06225	.02172
$K=2$	.53986	.15102	.06121	.02166 .06057
$K=3$	.48979	.14961	.06115 .39149	.02165 .05557

Таблица 3

$$\boldsymbol{V_3(r) = -[2q/a^2\pi]\arctan(a/r)}$$

q_0	1	5	10	20	50	100
$K=1$	1.7245	.47196	.29399	.19037	.11175	.07628
$K=2$	1.7134 3.2975	.44574 .80705	.26794 .47806	.16792 .29718	.09556 .16784	.06422 .11233
$K=3$	1.6959 3.2834 4.8721	.44495 .75305 1.1461	.26793 .41606 .66692	.16739 .24004 .40924	.09393 .12642 .22786	.06236 .08223 .15112

Приведенные примеры демонстрируют хорошую сходимость процедуры нахождения спектра УШ при увеличении ранга матрицы характеристического уравнения (4).

Авторы глубоко благодарны В. Ч. Жуковскому и А. В. Борисову за плодотворное обсуждение результатов работы.

Литература

1. *Павлова О.С., Френкин А.Р.* // ТМФ. 2000. **125**, № 2. С. 242.
2. *Павлова О.С., Френкин А.Р.* // Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон. 2001. № 2. С. 58 (Moscow University Phys. Bull. 2001. N 2. P. 66).
3. *Павлова О.С., Френкин А.Р.* // Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон. 2001. № 5. С. 37. (Moscow University Phys. Bull. 2001. N 5. P. 44).
4. *Павлова О.С., Френкин А.Р.* // Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон. 2002. № 5. С. 16. (Moscow University Phys. Bull. 2002. N 5. P. 21).
5. *Бейтмен Г., Эрдейи А.* // Таблицы интегральных преобразований. Т. 1. М., 1969.

Поступила в редакцию
16.04.04